

Název práce: Struktura a magnetické vlastnosti sloučenin s *f*-elektrony a jejich hydridů

Autor: Silvie Mašková

Katedra: Katedra fyziky kondenzovaných látek

Vedoucí dizertační práce: Doc. RNDr. Ladislav Havela, CSc., Katedra fyziky kondenzovaných látek, Matematicko-fyzikální fakulta, Karlova Univerzita, Praha, Česká republika

Abstrakt: Magnetické vlastnosti byly studovány u několika systémů na bázi aktinoidů a vzácných zemin. Nepřímo jsme ukázali, že anizotropie kompresibility a termální expanze souvisí se směrem magnetických momentů U-sloučenin. Snadněji stlačitelný směr (směr nejkratších meziuranových vzdáleností) je kolmý na magnetické momenty. Vzácnozeminné sloučeniny typu 2-2-1 mohou absorbovat mnohem větší množství vodíku než jejich uranové protějšky. Uranové sloučeniny jsou stabilnější vůči hydrogenaci v důsledku zapojení 5*f*-elektronů do kovové vazby. Základní elektronové vlastnosti β -Pu byly určeny pomocí simulace sloučeninou ζ -Pu₁₉Os. Pro porovnání byly určeny i vlastnosti nízkoteplotní variety η -Pu₁₉Os. Bylo ukázáno, že objem není primární řídicí parametr vlastností plutonia, když je β -Pu nejvíce korelovanou fází.

Klíčová slova: uranové sloučeniny, vzácné zeminy, krystalová struktura, magnetické vlastnosti, hydrogenace